



TITLE:

# Interface Thermal Resistance and Thermal Diode Effect(Mathematical Aspects and Simulation of Complex Fluids)

AUTHOR(S):

小串, 典子; 伊藤, 伸泰

---

CITATION:

小串, 典子 ...[et al]. Interface Thermal Resistance and Thermal Diode Effect(Mathematical Aspects and Simulation of Complex Fluids). 数理解析研究所講究録 2007, 1539: 139-148

ISSUE DATE:

2007-02

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/59060>

RIGHT:

# Interface Thermal Resistance and Thermal Diode Effect

小串典子 (Fumiko Ogushi)<sup>1</sup>

伊藤伸泰 (Nobuyasu Ito)<sup>1</sup>

Baowen Li<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

<sup>1</sup> School of Engineering, Department of Applied Physics, The University of Tokyo,

<sup>2</sup> Department of Physics, Centre for Computational Science and Engineering,

National University of Singapore

## 概要

近年提案されている thermal diode の現実的な粒子系による評価・研究のため、固液界面における界面熱抵抗について、非平衡分子動力学法を用いて調べた。温度勾配の向きによらず固液共存状態を維持するため、質量と相互作用の強さの異なる2種類の Lennard-Jones 粒子を用いる。定常状態において、固液各相では Fourier 型の熱伝導が実現しており、熱伝導率の違いから各相では異なる温度勾配が得られた。また、固液界面では温度分布にギャップが見られた。固相から液相へ熱が流れる場合、界面熱抵抗は界面温度に対しべき的 ( $R_{S-L} = 17.88(64)T^{-7.83(50)}$ ) に減少する。これに対し、液相から固相へ熱が流れる場合には、界面熱抵抗はほぼ一定値 4.65(04) を示した。この界面熱抵抗の温度依存性の違いから、熱流の絶対値は温度勾配の向きに対して非対称性を示し、系は thermal diode 効果を持つ。

## 1 はじめに

熱伝導現象は物理的にも工業的にも最も基礎的な課題の一つであり、19 世紀 Fourier の時代から現在に至るまで、多くの研究が行われている。巨視的な系における熱伝導については Fourier の法則 (熱流が温度勾配に比例し、熱伝導率は  $J = \kappa \Delta T$  の比例係数  $\kappa$  として得られる) により良く記述される事が知られている。しかしながらいっぽうで、Fourier の法則に従うような拡散型の熱輸送の微視的な成立起源や条件については、未だ十分な理解は得られていない。このような視点から、計算機シミュレーションを用いた研究が数多く行われている [1-13]。その中でも、沸騰現象のような相転移を伴う熱伝導現象やその他様々な非定常熱伝導現象において重要な役割を担う界面は興味深い対象である。界面については核生成論との関わりから論じられる事も多く、相界面の構造や物性も研究されている。しかし、界面のような微視的な構造を持つ系におけるエネルギー輸送についても、未だ十分な理解は得られていない。

界面における特徴的な熱伝導現象の一つに、界面熱抵抗がある。1941 年、P. L. Kapitza は極低温実験中に液体ヘリウムと銅の間の境界面において温度分布が有限のギャップを持つ事を発見した [14]。このように、界面において非常に熱伝導率の小さい領域が存在し、そのため温度分布にギャップが生じる現象を界面熱抵抗という。特に固液界面における熱抵抗は、発見者の名前から Kapitza resistance

と呼ばれる。Kapitza resistance は異種物質間境界面における熱抵抗として発見されたが、現在では異種物質間界面に限らず一般に様々な界面において見られる現象である事が受け入れられている。Kapitza resistance の発見以降、実験のみならず界面熱抵抗を説明する理論的研究も多数行われてきた [15, 16, 17]。一般に、Kapitza resistance についてはフォノン散乱による解釈が用いられるが、非常に低温な場合を除き、フォノン散乱を用いた解釈では不十分であることが知られており、現在でも多くの研究が行われている [18, 19, 20, 21]。

界面熱抵抗の応用として、Li *et al.* は 1 次元格子系を用いた thermal diode を提案した。[22, 23] 2 種類の異なる 1 次元非線形格子を繋げた系において、両端に異なる温度の熱浴をつけ、系に温度勾配を与える。同じ温度差で向きを反転させた 2 つの場合では、界面熱抵抗は温度勾配の向きに依存して異なる値を持つ。そのため熱流も非対称性を持ち、系はダイオード効果を示す。2006 年には、実際にカーボンナノチューブを用いた実験 [24] も行われており、今後更なる研究が期待されている。

界面を含むような不均質な系におけるエネルギー輸送を扱うには、一般に解析的手法では難しく、計算機シミュレーションを用いた研究が行われている。本研究では、近年提案されている thermal diode のより現実的な粒子系による評価・研究のため、分子動力学法を用いて固液界面における界面熱抵抗について調べた。分子動力学法では、エネルギー輸送を担う物質を離散化して取り扱うため、各構成粒子はそれぞれが定められた相互作用を及ぼし合いながらニュートンの運動方程式に従うのみである。従って、様々な恣意的仮定を極力排除した状態で系を扱う事が可能であり、また、系は自発的に相転移を記述する事も可能である。

分子動力学法において、最もシンプルな粒子モデルの一つは排除体積効果のみを持つ剛体粒子モデルである。3 次元剛体粒子系における研究 [10] では、非平衡シミュレーションを用いる事で、固相・流体相の二相共存系を実現した。定常状態では、温度分布は各相においてそれぞれ異なる温度勾配を持ち、両相において Fourier 型の熱伝導が実現した。しかしながら、固相・流体相の相界面は非常に薄く、これから界面における特徴的な構造等を議論する事は困難である。また、剛体粒子系では気液相転移を記述する事は出来ないため、気液界面や、局所的な構造が重要となりうる系における熱伝導について調べるためには、引力相互作用を持つ Lennard-Jones 粒子モデルが用いられる。

以下に粒子  $i$  と粒子  $j$  の間における Lennard-Jones(12-6) ポテンシャルを示す。

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left\{ \left( \sigma/r_{ij} \right)^{12} - \left( \sigma/r_{ij} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

$r_{ij}$  は粒子  $i$  と粒子  $j$  間の距離であり、 $\epsilon$  及び  $\sigma$  はそれぞれ相互作用の強さ及び粒子の直径を決める。Lennard-Jones ポテンシャルは引力相互作用を持ち、固相、液相、気相、流体相やそれらの多相共存状態を実現する。また、希ガスの性質を良く再現する粒子モデルとしても知られており、気液相転移を扱うような場合には広く用いられている。

3 次元 Lennard-Jones 粒子系における単相での熱伝導については、剛体粒子系等を用いた先行研究と同様熱伝導率が系のシステムサイズ  $L$  に対し、 $1/\sqrt{L}$  のサイズ依存性を持つ [11]。この振る舞いは、超臨界流状態のみでなく気液固各相においても見られる。また、非平衡シミュレーションを用いることで 3 次元 Lennard-Jones 粒子系において定常界面を含む気液共存状態を実現する事が可能である [25]。定常状態において、気液各相では Fourier 型の熱伝導が実現しており、熱伝導率の違いから各相では異なる温度分布が得られる。定常状態における密度分布からは、非対称な界面構造が得られた。これは、非対称な二重井戸型の自由エネルギー密度モデルを用いて良く記述される。さ

らに、定常状態へ至る緩和のダイナミクスから、気液界面においても界面熱抵抗の存在が示唆されている。

本研究では、3次元 Lennard-Jones 粒子系を用いて固液界面における界面熱抵抗と、その温度依存性及び thermal diode 効果について議論する。

## 2 モデル及びシミュレーション

本研究では温度勾配の向きに関わらず常に系の同じ側を固相に保つため、構成粒子として、質量と相互作用の強さの異なる2種類の Lennard-Jones 粒子を用いる。このうち固相を再現する粒子を固体粒子、液相を再現する粒子を液体粒子と呼ぶ。

### 2.1 モデル

以下に、系のハミルトニアンを示す。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Solid}} + \mathcal{H}_{\text{Liquid}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi(|q_{Si} - q_{Lj}|), \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_{\text{Solid}} = \sum_{i=1}^N \frac{p_{Si}^2}{2m_S} + \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j} \phi(|q_{Si} - q_{Sj}|),$$

$$\mathcal{H}_{\text{Liquid}} = \sum_{i=1}^N \frac{p_{Li}^2}{2m_L} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi(|q_{Li} - q_{Lj}|),$$

$\mathcal{H}_{\text{Solid}}$  は固体粒子についてのハミルトニアン、 $\mathcal{H}_{\text{Liquid}}$  は液体粒子についてのハミルトニアンを示す。 $m, p_{[S,L]i}$  及び  $q_{[S,L]i}$  は、それぞれ粒子  $i$  の質量、運動量、及び座標を示す。添字  $S$  及び  $L$  は各物理量がそれぞれ固体粒子及び液体粒子についての値であることを示す。 $\alpha$  は、液体粒子間の相互作用に対して固体粒子間の相互作用の強さを示す無次元パラメータである。無次元パラメータ  $\alpha$  及び固体粒子と液体粒子の質量比  $m_S/m_L$  はそれぞれ 10.0 とし、本研究で用いた温度領域において系が常に固相と液相を維持するよう選んでいる。 $\phi(r) = 4\epsilon \left\{ (\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6 \right\} + \phi_0$  は Lennard-Jones (12-6) potential を示す。計算コストを軽減するため、 $\phi(r_c) = 0$  となるよう粒子間相互作用にカットオフ  $r_c = 3\sigma$  を与える。質量、長さ及びエネルギーは  $m_L, \sigma$  及び  $\epsilon$  を用いて無次元化した値を用いる。

### 2.2 シミュレーション

3次元直方体  $L_x \times L_y \times L_z = 14 \times 6 \times 6$  を用いる。(図1)  $L_x, L_y, L_z$  はそれぞれ  $x$ -,  $y$ -,  $z$ -方向における系の長さを表す。境界条件として  $y, z$  方向については周期境界を与え、 $x$  方向には系の両端 ( $x = 0, 14$ ) に弾性壁をおく。弾性壁を超えた粒子は、壁との距離に応じた力を受け、 $0 \leq x \leq 14$  内に引き戻される。 $x \leq 7.0$  の領域に固体粒子を、残りの領域に液体粒子を詰める。固体粒子、液体粒子とも、粒子数 250 個とした。

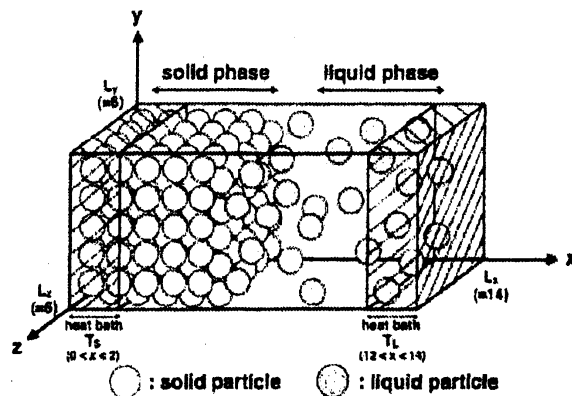


図 1: シミュレーション系の形状: システムサイズは  $L_x \times L_y \times L_z = 14 \times 6 \times 6$ 、粒子数は固体粒子及び液体粒子とも 250 個。斜線部 (系の両端  $x = 0, 14$  から幅 2 の領域) は熱浴領域を示す。熱浴内は能勢-Hoover 熱浴を用いてそれぞれ温度  $T_S, T_L$  に制御する。

系の両端から一定幅  $\Delta x_{HB} = 2$  の領域を能勢-Hoover 熱浴を用いてそれぞれ温度  $T_S$  及び  $T_L$  ( $T_S \neq T_L$ ) に温度制御する。これにより、系は定常熱流状態を実現する。能勢-Hoover 熱浴 [26, 27] は、定められた熱浴温度  $T_{HB}$  と熱浴領域内の粒子の持つ運動エネルギーとの差に応じて一種の摩擦力を粒子に与えることで、熱浴領域内を定められた温度  $T_{HB}$  に制御する。熱浴における運動方程式は

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = F - \zeta m \frac{dq}{dt}, \quad (3)$$

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{2(K - K_{HB})}{Q}, \quad (4)$$

である。ここで  $F$  はポテンシャルによる力、 $q$  及び  $\zeta, K, Q$  はそれぞれ粒子の座標、熱浴変数、粒子の持つ運動エネルギー及び時定数を表す。熱浴の運動エネルギー  $K_{HB}$  の値は、定められた温度  $T_{HB}$  から

$$K_{HB} = \frac{3}{2} k_B T_{HB}, \quad (5)$$

により定める。ここで  $k_B$  はボルツマン定数である。差分法は一定の時間間隔  $dt$  を用いて各粒子については Verlet 法を、熱浴変数についてはオイラー差分を用いた。

### 3 結果

本研究では、固液界面における界面熱抵抗の温度及び熱流の向きに対する依存性を調べた。各粒子を体心立方格子に組み、全系において温度一定 ( $T(x) = 1.2$ )、及び各相において密度一定の平衡状態を初期状態とする。 $t = 0$  において系の両端に異なる温度 ( $T_S \neq T_L$ ) の熱浴を付け、温度勾配を与える。この条件下で、固相が高温の場合、液相が高温の場合共に系は定常状態に達し、固液各相では Fourier 型の熱伝導を実現する。固相と液相では熱伝導率の違いに起因して異なる温度勾配を持

ち、界面では温度分布にギャップが見られた。以下、添字  $S \rightarrow L$  は固相から液相へ熱が流れる場合について、添字  $L \rightarrow S$  は液相から固相に熱が流れる場合についての物理量であることを示す。また、高温熱浴の温度は常に初期状態と同じ 1.2 とし、低温熱浴の温度は 1.0 から 0.7 までとする。

### 3.1 温度分布

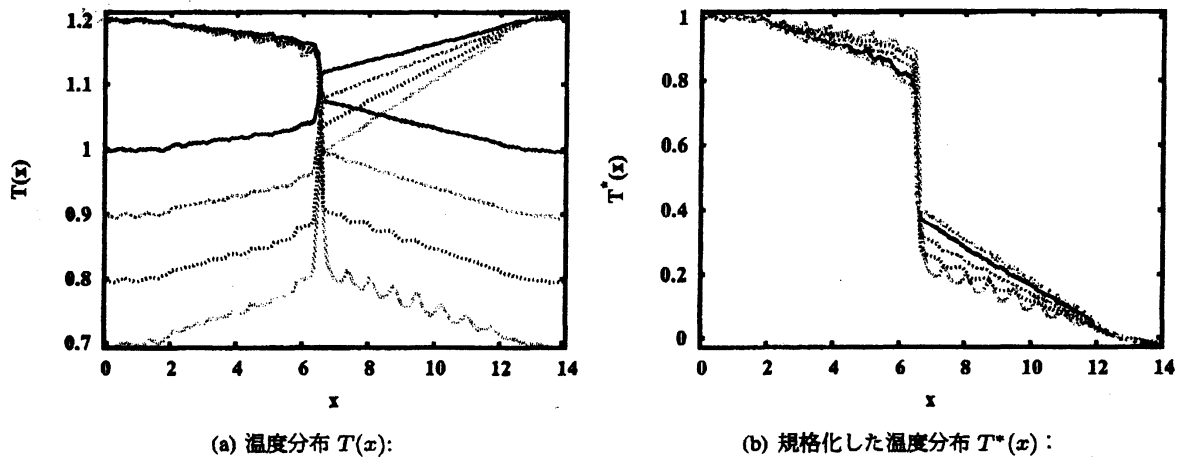


図 2: 温度分布：固相と液相ではそれぞれ Fourier 型の熱伝導が実現し、各相に置いて異なる温度勾配が得られ、固液界面では温度分布にギャップが存在する。

系における物理量の空間プロファイルを求める為、 $x$ -方向に系を一定の幅  $\delta x$  でスライスした局所セルを考える。中心位置が  $x$  であるセルにおける局所温度  $T(x)$  は

$$T(x) = \frac{\langle \vec{p}_i^2 \rangle_{\text{cell}}}{3k_B m_i} \quad (6)$$

である。 $\langle \dots \rangle_{\text{cell}}$  は各セルにおける長時間平均を表す。さらに、異なる熱浴温度での分布を比較するため、熱浴温度で規格化した温度  $T^*(x) = (T(x) - T_L)/(T_S - T_L)$  を考える。図 2 に温度分布  $T(x)$  及び熱浴温度を用いて規格化した温度  $T^*(x)$  を示す。定常状態では、固液各相において Fourier 型の熱伝導が実現しており、各相では熱伝導率の違いに起因して、異なる温度勾配を持つ事が分かる。また、界面では温度分布にギャップ  $\Delta T$  が見られた。

図 2-(a) より、 $T_L = 0.7, 0.8$  の場合には液相側の界面付近において波状の分布が見られる。これは局所温度を求める際に平均の運動量を差し引いていないため、温度を求めた局所セルの幅が小さい場合に定在波が顕在化したものと考えられる。温度が波状の分布を持つ場合については、分布に見られる波の底を取ってその位置での温度とした。

いま、界面における温度ギャップの中心温度を界面温度 ( $T_{S \rightarrow L}, T_{L \rightarrow S}$ ) として定義する。図 3 に界面温度及び温度ギャップを示す。本シミュレーションでは固液界面の位置はほぼ固定されており、また、液相に比べ固相の熱伝導率が高い。そのため界面温度、界面での温度ギャップは、共に液相から固相へ熱が流れる場合に比べ固相から液相に熱が流れる場合に大きな値をとる。図 3 より、界

面温度は  $T_{S \rightarrow L}$ ,  $T_{L \rightarrow S}$  共に熱浴の温度差が大きくなるに従い、いずれもほぼ線形に減少していることが分かる。また、界面における温度ギャップも界面温度が高くなる（熱浴の温度差が小さくなる）に従い、 $\Delta T_{S \rightarrow L}$ ,  $\Delta T_{L \rightarrow S}$  共に線形に減少している。

本研究において用いた温度領域では、固相粒子は初期条件において与えられた体心立方格子を組んだまま、固相を維持している。

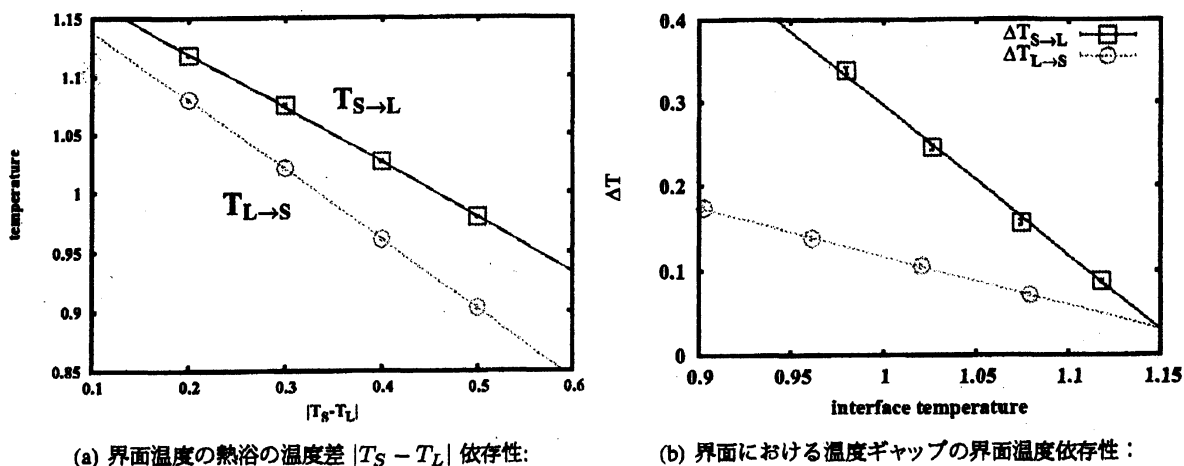


図 3: 界面における温度特性：液相に比べ固相の熱伝導率が大きく、さらに、固液界面の位置はほぼ固定されているため、界面温度は常に  $T_{S \rightarrow L} \leq T_{L \rightarrow S}$  であり、温度ギャップは  $\Delta T_{S \rightarrow L} \leq \Delta T_{L \rightarrow S}$  である。また、界面温度は熱浴の温度差が大きくなるに従い減少し、温度ギャップは界面温度が高くなる（熱浴の温度差が小さくなる）に従い減少する。

### 3.2 熱流及び界面熱抵抗

熱流  $\vec{J}$  を運動エネルギー、ポテンシャルエネルギー、力積から下記のように定義する。

$$\vec{J} = \frac{1}{V} \sum_i \left[ \frac{p_i^2}{2m_i} \vec{p}_i + \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \frac{\vec{p}_i}{2m_i} - \sum_{i \neq j} \frac{\vec{p}_i \cdot \vec{F}_{ij}}{2m_i} \vec{r}_{ij} \right], \quad (7)$$

ここで、 $\phi_{ij}$  及び  $\vec{F}_{ij} = -\partial \phi_{ij} / \partial \vec{r}_{ij}$  は Lennard-Jones ポテンシャル及び粒子  $i, j$  間に働く力を示す。固液界面におけるエネルギー輸送を調べるため、熱流  $\vec{J}$  の x 成分 ( $J_{S \rightarrow L}$ ,  $J_{L \rightarrow S}$ ) を求める。図 4 (a) に、熱流の絶対値 ( $J_{S \rightarrow L}$ ,  $J_{L \rightarrow S}$ ) の界面温度依存性を示す。

熱流は界面温度が高くなる（熱浴の温度差が小さくなる）に従い減少するが、その温度依存性は熱流の向きにより異なっている。図 4 より、熱流  $J_{L \rightarrow S}$  は熱流  $J_{S \rightarrow L}$  よりも強く界面温度に依存して減少している。また特に、界面温度が小さい（熱浴の温度差が大きい）場合には、熱流の絶対値も固相から液相に熱が流れる場合に比べ、液相から固相へ熱が流れる場合の方が大きな値を持つ事が分かる。

界面における温度分布のギャップ  $\Delta T$  及び熱流  $J$  から、界面熱抵抗  $R = \Delta T / J$  を求める。いま、界面熱抵抗は温度に対しべき的に減少すると仮定し、 $R = \alpha \cdot T^{-\beta}$  の振る舞いを示すものとする。

図 4 (b) に、シミュレーションより得られた界面熱抵抗の値と共に  $R = \alpha \cdot T^{-\beta}$  を用いてフィットした結果 ( $R_{S \rightarrow L} = 17.88(64)T^{-7.83(50)}$  (赤線) 及び  $R_{L \rightarrow S} 4.65(04)$  (緑線)) を示す。シミュレーション結果より、図 4 (b) より、実際に界面熱抵抗は界面温度に対しべき的に減少するとして良くフィットされる事が分かる。シミュレーション結果より、固相から液相に熱が流れる場合、 $R_{S \rightarrow L}$  は  $\alpha = 17.88(64)$  および  $\beta = 7.83(50)$  となる。また、液相から固相に熱が流れる場合には、 $R_{L \rightarrow S}$  は  $\alpha = 4.65(04)$  および  $\beta = -0.02(11)$  となり、 $R_{L \rightarrow S}$  はほぼ一定 4.65(04) となる。

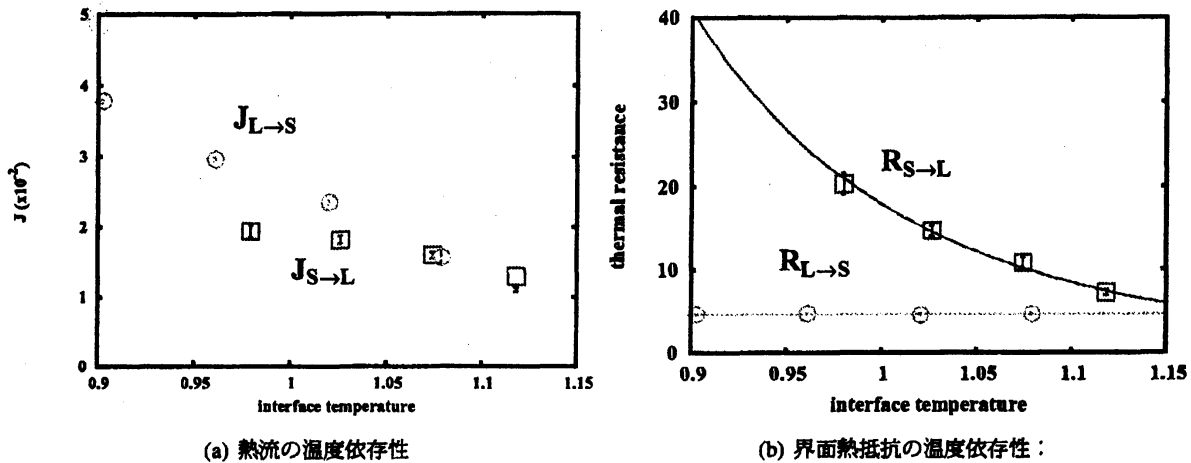


図 4: 熱流及び界面熱抵抗の温度依存性：界面温度が高くなる（熱浴の温度差が小さくなる）に従い、熱流は  $J_{S \rightarrow L}$  に比べ  $J_{L \rightarrow S}$  がより強く界面温度に依存して減少する。固相から液相に熱が流れる場合、界面熱抵抗  $R_{S \rightarrow L}$  は  $T_{S \rightarrow L}^{-7.83(50)}$  の依存性を示す。一方、液相から固相へ熱が流れる場合には  $R_{L \rightarrow S}$  はほぼ一定値 4.65(04) を示す。

### 3.3 thermal diode 効果

図 4 (b) に示したように、界面熱抵抗は熱流の向きにより異なる界面温度依存性を示す事が分かった。このため、熱流の絶対値は温度勾配の向きに対して非対称性を持つ。すなわち、系は thermal diode 効果を示す。図 5 に熱流の絶対値の比  $J_{L \rightarrow S}/J_{S \rightarrow L}$  を示す。

thermal diode は界面物性により支配されている。従って、thermal diode 効果は界面熱抵抗の温度依存性に帰着し、この thermal diode は、固相—界面—液相の三つの抵抗からなる直列回路として捉えることができる。本研究で用いた系を、固液各相におけるバルクの熱抵抗 ( $R_S$  及び  $R_L$ ) と界面熱抵抗からなる直列回路と考える。定義より、熱流  $J$  は系の温度差  $|T_S - T_L|$  と熱抵抗  $R_S + R_i + R_L$  の比で表される。従って、熱流の絶対値の比  $J_{L \rightarrow S}/J_{S \rightarrow L}$  は熱抵抗の比を用いて

$$\frac{J_{L \rightarrow S}}{J_{S \rightarrow L}} = \frac{R_S + R_L + R_{S \rightarrow L}}{R_S + R_L + R_{L \rightarrow S}}, \quad (8)$$

となる。いま、バルクの熱抵抗  $R_S, R_L$  については温度依存性は無視できるものとし、シミュレーションより得られた値を用いる。界面熱抵抗については図 4 (b) より得られた界面温度依存性  $R_{S \rightarrow L} =$



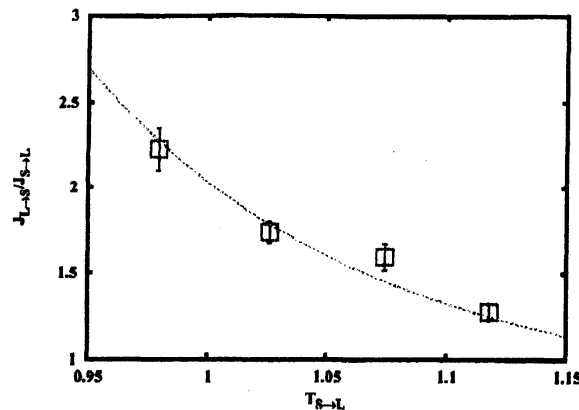


図 5: thermal diode 効果：熱流比  $J_{S \rightarrow L} / J_{L \rightarrow S}$  を界面温度  $T_{S \rightarrow L}$  に対してプロットした。四角はシミュレーション結果を、破線は式 (9) より得られた熱流比の界面温度依存性を示す。

$17.88(64) \cdot T_{S \rightarrow L}^{-7.83(50)}$ 、及び  $R_{L \rightarrow S} = 4.65(04)$  を用いると、熱流比は

$$\frac{J_{L \rightarrow S}}{J_{S \rightarrow L}} = \frac{R_S + R_L + 17.88(64) \cdot T_{S \rightarrow L}^{-7.83(50)}}{R_S + R_L + 4.65(04)}, \quad (9)$$

となり、熱流比は界面熱抵抗の比により制御されていることが分かる。本シミュレーションにおいては、液相から固相へ熱が流れる場合には界面熱抵抗が一定値を持つため、結果として熱流比の温度依存性は固相から液相へ熱が流れる場合の界面温度により記述される。図 5 にシミュレーションより得られた熱流比と共に式 (9) より予想される熱流比の温度依存性（緑線）を示す。図 5 より、実際にシミュレーションから得られた熱流比の振る舞いは式 (9) より予想される振る舞いと良く一致する事が分かる。

## 4 まとめ

非平衡分子動力学法を用いて、3次元 Lennard-Jones 粒子系における固液界面での界面熱抵抗および系の持つ thermal diode 効果について調べた。温度勾配の向きによらず固相と液相を維持するため、質量と相互作用の異なる 2 種類の Lennard-Jones 粒子を用いた。定常状態では、固液各相において Fourier 型の熱伝導が実現する。熱伝導率の違いから両相では異なる温度勾配を持ち、固液界面では温度分布にギャップが存在する。

本研究で用いた系では、固液界面の位置は固定されている。また、液相に比べ固相の熱伝導率が大きいため、液相から固相へ熱が流れる場合に比べて固相から液相へ熱が流れる場合の方が界面温度は高く、界面における温度ギャップは大きな値を持つ。また、界面温度が高くなる（熱浴の温度差が小さくなる）に従い、熱流は減少する。このとき系に流れる熱流は温度勾配の向きに対して異なる界面温度依存性を示し、熱流の絶対値は非対称性を持つ。これは界面熱抵抗が温度勾配の向きに対して非対称であり、異なる温度依存性を持つためである。

thermal diode は界面物性により決まるものである。従って、熱流の絶対値の非対称性、つまり thermal diode 効果は界面熱抵抗の温度依存性に帰着する。この thermal diode は界面の抵抗により

制御される直列回路であり、熱流比の温度依存性は、バルクの抵抗の温度依存性を無視した場合、界面熱抵抗の温度依存性のみで記述される。実際にシミュレーションから得られた熱流の絶対値の比は系を固相—界面—液相の3つの抵抗からなる直列回路として考えた場合に予想される熱流比の振る舞いと良く一致する。固相から液相へ熱が流れる場合、界面熱抵抗  $R_{S \rightarrow L}$  は界面温度に対して  $17.88(64) \cdot T_{S \rightarrow L}^{-7.83(50)}$  とべきで減少する。これに対し、液相から固相へ熱が流れる場合には、界面熱抵抗  $R_{L \rightarrow S}$  はほぼ一定値  $4.65(04)$  を示した。従って、本シミュレーションで見られた熱流比の振る舞いは固相から液相へ熱が流れる場合の界面温度のみで記述される。

## 参考文献

- [1] J. L. Lebowitz and H. Spohn, J. Stat. Phys. **19**, 633 (1978).
- [2] G. Casati, J. Ford, F. Vivaldi, and W. M. Visscher, Phys. Rev. Lett. **52**, 1861 (1984).
- [3] B. Hu, B Li, and H. Zhao, Phys. Rev. E **57**, 2992, (1998).
- [4] B. Hu, B Li, and H Zhao, Phys. Rev. E **61**, 3828 (2000).
- [5] D. Alonso, R. Artuso, G. Casati and I. Guarneri, Phys. Rev. Lett. **82**, 1859 (1999).
- [6] B Li, L Wang and B Hu, Phys. Rev. Lett. **88**, 223901 (2002).
- [7] J.-S Wang and B Li, Phys. Rev. Lett, **92**, 074302 (2004).
- [8] J.-S Wang and B. Li, Phys. Rev. E **70**, 021204 (2004).
- [9] T. Shimada, T. Murakami, S. Yukawa, K. Saito and N.Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **69** 3150 (2000).
- [10] T. Murakami, T. Shimada, S. Yukawa and N.Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **72** 1049 (2003).
- [11] F. Ogushi, S. Yukawa and N.Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 827 (2005).
- [12] H. Shiba, S. Yukawa and N.Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 103001 (2006).
- [13] T. Yuge, N. Ito and A. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1895 (2005).
- [14] P. L. Kapitza, J. Phys. USSR **4**, 181 (1941).
- [15] W. A. Little, Can. J. Phys. **37**, 334 (1959).
- [16] M. E. Lumpkin, W. M. Saslow and W. M. Visscher, Phys. Rev. B **17**, 4295 (1978).
- [17] E. T. Swartz and R. O. Pohl, Rev. Mod. Phys. **61**, 605 (1989).
- [18] S. Pettersson and G. D. Mahan, Phys. Rev. B. **42**, 7386 (1990).
- [19] Cherng-Jhy Twu and Jeng-Rong Ho, Phys. Rev. B. **67**, 205422 (2003).

- [20] S. R. Phillpot, P. K. Schelling and P. Keblinski, *J. Mater. Sci.* **40**, 3143 (2005).
- [21] B. Hu, L. Yang and Y. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 124302 (2006).
- [22] B. Li, L. Wang, and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 184301 (2004).
- [23] B. Li, J.-H. Lan, and L. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 104302 (2005).
- [24] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and Z. Zettl, *Science*, **314**, 1121 (2006).
- [25] F. Ogushi, S. Yukawa and N. Ito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 073001 (2006).
- [26] S. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
- [27] W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).